



TITLE:

計算機シミュレーションによる秩序・無秩序現象の研究(「相転移」研究会報告,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

松原, 武生; 松田, 博嗣

CITATION:

松原, 武生 ...[et al]. 計算機シミュレーションによる秩序・無秩序現象の研究(「相転移」研究会報告,基研研究会報告). 物性研究 1967, 9(2): B37-B41

ISSUE DATE:

1967-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86111>

RIGHT:

計算機シミュレーションによる秩序・無秩序現象の研究

松 原 武 生 (京大理)

松 田 博 嗣 (京大基研)

標記テーマについて荻田直史・上田顕とわれわれの進めつつある協同研究を簡単に報告する。

最近二次相転移点近傍の dynamics の特異性について種々理論的研究が行なわれているが、まだ一次元 Glauber model 以外については余りよく判っていない。そこで Glauber と同様熱槽と接触する Ising spin 系を考え、その時間的发展を計算機に simulate させることにより、転移点近傍の特異性ならびに秩序・無秩序現象一般についての知見を得ようとするものである。

さて model Hamiltonian として $H = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$, $\sigma_i = \pm 1$ をとる。ここに i, j は 2 次元正方格子の格子点の番号である。各格子点の spin の状態は $\{\sigma_i\}$ で特徴づけられている。

i 番目の格子点に働く local field は $E_i = \sum_j J_{ij} \sigma_j$ で与えられる。local field が E に等しい格子点の spin は熱槽との相互作用により状態 σ より $-\sigma$ に単位時間当りの遷移確率

$$\begin{aligned} W(\sigma | E) &= \frac{1}{\tau(T)} e^{-\beta \sigma E} \\ &= \frac{\alpha(T)}{2} \{ \operatorname{ch}(\beta E) - \sigma \operatorname{sh}(\beta E) \} \end{aligned}$$

で遷移するとする。 $\tau(t) = 2/\alpha(T)$ は温度 T の任意の関数として上の仮定は平衡状態における詳細釣り合いの条件をみたす。このモデルは最近接相互作用のとき平衡状態については Onsager - Yang の厳密解をもち、spin の向き σ を水素結合の double minimum のどちらかに proton が存在するかに対応づければ強誘電体 KD_2PO_4 に対するモデルとなり得るので興味深い。われわれの simulation ではさしずめ格子点数は $2 \times 128 \times 128$,

非線形緩和過程の現象論

$$J_{ij} = \begin{cases} J (> 0) & (i, j \text{ が最近格子点のとき}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

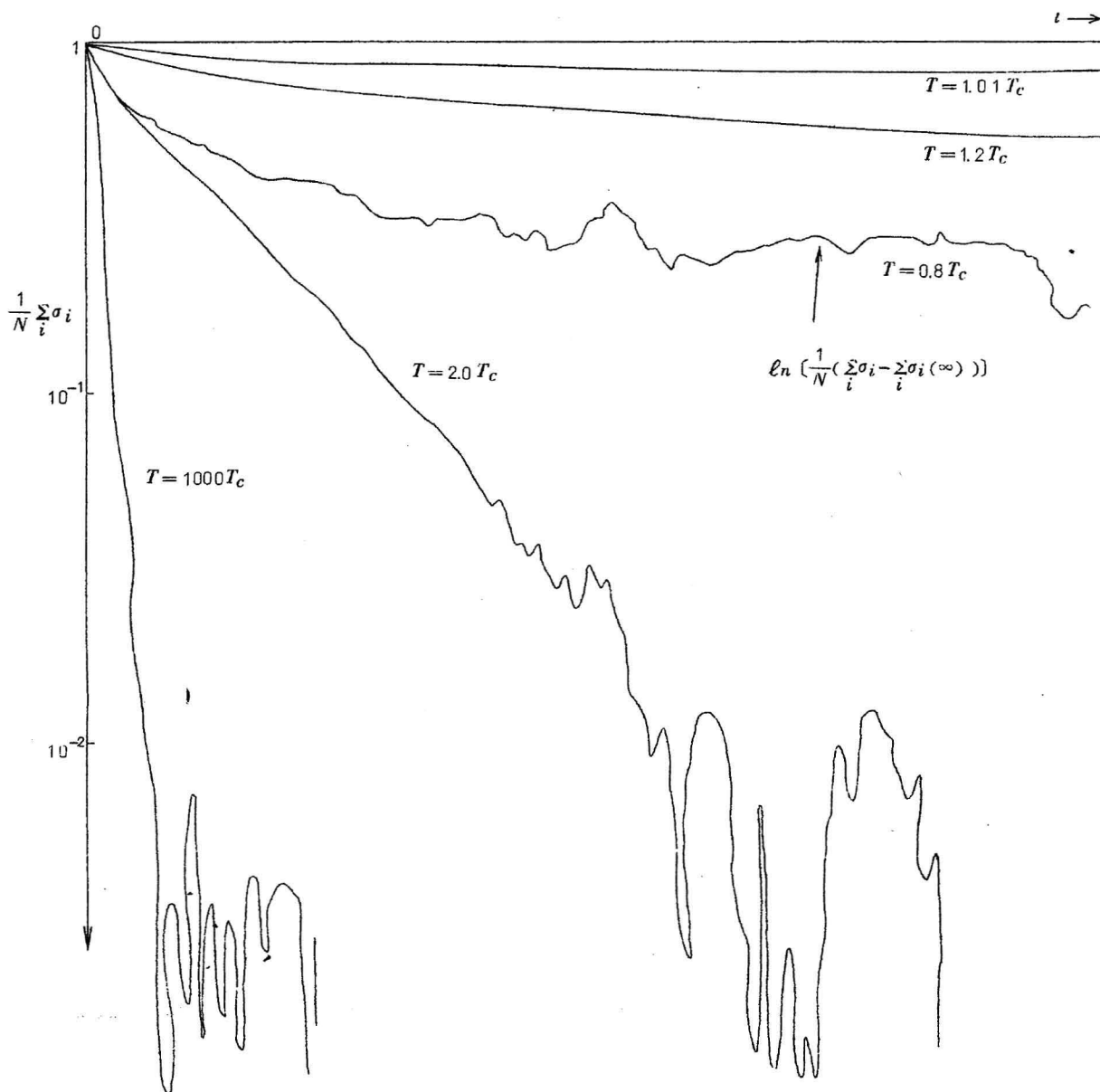
$$\alpha(T) = \frac{2}{\tau_0} e^{-4\beta J}, \quad \frac{2}{\tau_0} = 0.7 \text{ と取った。}$$

Onsager によれば Curie 温度 T_0 は $J/kT_0 \simeq 0.44$ をみたす。時間 $t = 0$ のとき $\sigma_i = 1$ (for all i) として全格子点の状態 $\{\sigma_i\}$ を計算機に記憶させ, $T/T_0 = 1000, 2, 1.05, 1.01, 0.3$ の各場合について, その時間発展を計算機に行なわせた。その結果を図と表に示す。

T/T_0	$\tau_M(T) / \tau_M(\infty)$ (Mason 理論)	$\tau_S(T) / \tau_S(\infty)$ (simulation)
2	4.8	~ 10
1.2	26	~ 100
1.01	577	~ 1000

$T/T_0 = 0.8$ のとき格子点当りの分極 $\frac{1}{N} \sum \sigma_i$ は Yang の解析解によく近接する。図より分極の時間発展は大体時間の順に6つの段階に分けられることが判る。才1段階は完全に分極した状態からの緩和過程で, ここでは平衡状態からの外れが大きく, 非線型効果が現われている。才2段階は semi-log plot の図ではほとんど一直線で現わされている部分で, Hill-Lochiki の理論のように緩和時間に分布があるようには見えない。この段階における直線の勾配より得られた緩和時間は系の大きさにはよらぬものと期待される。才3段階では不規則なゆらぎが現われており, これは系が平衡状態に達してゆらいでいるものと考えられ, それが始まるときの格子点当りの分極の大きさは系の大きさに依存すると期待される。

さてこのような系の集団を考え, 一つの格子点の (σ, E) が (σ', E') なる値である確率を $p(\sigma', E')$ とする。集団平均を $\langle \dots \rangle$ と記し, 確率 $p(\sigma', E')$ は格子点によらないとすると



$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \sum_i \frac{d \langle \sigma_i \rangle}{dt} &= \frac{d \langle \sigma \rangle}{dt} = -2 \sum_{\sigma', E'} p(\sigma', E') \sigma' W(\sigma' | E') \\ &= -\alpha(T) \{ \langle \sigma \operatorname{ch}(\beta E) \rangle - \langle \operatorname{sh}(\beta E) \rangle \}\end{aligned}$$

となる。高温近似として右辺を展開して β の一次まで取ると

$$\begin{aligned}\frac{d \langle \sigma \rangle}{dt} &\simeq -\alpha(T) \{ \langle \sigma \rangle - \beta \langle E \rangle \} \\ &\simeq -\alpha(T) (1 - J\beta z) \langle \sigma \rangle \quad (z=4, \text{最近接格子点数})\end{aligned}$$

となり Mason 理論の結果が得られる。この近似による。

緩和時間 $\tau_M(T) = \left[\alpha(T) \left(1 - \frac{T_C}{T} \right) \right]^{-1}$ を simulation の結果の緩和時間 τ_s (T) と比較すると、むしろ後者の方が緩和時間は大きく、著しい critical slowing down が起っている。もし Hill-Ischiki のように多緩和時間効果があれば mason 理論よりは critical slowing down は軽減される筈であるが、結果はむしろ逆になっている。このように緩和時間がむしろ長くなることは

$$\text{近似} \quad \langle \sigma \operatorname{ch}(\beta E) \rangle \simeq \langle \operatorname{ch}(\beta E) \rangle \langle \sigma \rangle$$

$$\langle \operatorname{sh}(\beta E) \rangle \simeq \langle \operatorname{sh}(\beta E)/E \rangle \langle E \rangle = Jz \langle \operatorname{sh}(\beta E)/E \rangle \langle \sigma \rangle$$

$$\text{を用い, } \frac{d \langle \sigma \rangle}{dt} \simeq -\alpha(T) \{ \langle \operatorname{ch}(\beta E) \rangle - Jz \langle \operatorname{sh}(\beta E)/E \rangle \} \langle \sigma \rangle$$

と書いて右辺中括弧内を β について 4 次まで展開し、 $T = T_C \simeq J/0.44k$ のときそれが 0 となることより内挿すると大体説明し得ることが判る。

研究会終了後 $T > T_C$ における才 2 段階において求められた緩和時間 $\tau_s(T) = - \left\{ \frac{d \ln \langle \sigma \rangle}{dt} \right\}^{-1}$ は $T \rightarrow T_C$ ($T > T_C$) ではほぼ帯磁率と同型の特異性 ($T - T_C$)^{-7/4} をもつことが確められた。

いま $T > T_C$ のとき $\frac{d \langle \sigma \rangle}{dt}$ が与えられた T の下で $\langle \sigma \rangle$ のみの関数であると仮定してみる。因みにこの仮定は 1 次元 Glauber model では正しい、すると $\langle \sigma \rangle$ の 1 次までの範囲で厳密に

$$\frac{d\langle\sigma\rangle}{dt} = -\alpha(T) \left[\langle e^{-\beta E} \rangle_+(0) + \left\{ \frac{d}{dx} \langle e^{-\beta E} \rangle_+(x) \right\}_{x=0} \right] \langle\sigma\rangle$$

が導かれる。ここに $\langle e^{-\beta E} \rangle_+(x)$ は $\langle\sigma\rangle = x$ で、一つの格子点の spin が $\sigma = 1$ なる条件下でその格子点に働く local field を E とするとき $e^{-\beta E}$ の集団平均を示す。更に外場 H が存在して Hamiltonian H に $-\sum_i \sigma_i H$ が加わると H 、および $\langle\sigma\rangle$ について一次の範囲で

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\sigma\rangle}{dt} &= -\alpha(T) \left[\langle e^{-\beta E} \rangle_+(0) + \left\{ \frac{d}{dx} \langle e^{-\beta E} \rangle_+(x) \right\}_{x=0} \right] \langle\sigma\rangle \\ &= -\alpha(T) \beta H \langle e^{-\beta E} \rangle_+(0) \end{aligned}$$

がえられ $\frac{d\langle\sigma\rangle}{dt} = 0$ のとき

$$\langle\sigma\rangle = \frac{\beta H \langle e^{-\beta E} \rangle_+(0)}{\langle e^{-\beta E} \rangle_+(0) + \left\{ \frac{d}{dx} \langle e^{-\beta E} \rangle_+(x) \right\}_{x=0}}$$

となる。定義により $T \rightarrow T_0$ でも $\langle e^{-\beta E} \rangle_+(0)$ は 0 に近づかないので、緩和時間と帯磁率は同型の特異性をもつことが判る。この理論の基礎となった前述の仮定は外場 H の下で系を平衡状態にしておき、ついで外場を 0 にした初期においては厳密に成立っている筈で、少くもそのときの緩和時間は帯磁率と同型の特異性をもつことが云える。このことは阿部龍蔵氏も別の方法で導かれた由である。

Time Dependent Ising Model With Long Range Interaction

山 田 知 司 (九大理)

相転移点近傍における static な性質は、最近までよく調べられている。しかしながら相転移点近傍における Dynamical な性質は、理論的にあまりよく